

トポロジカル絶縁体超格子の電子状態に及ぼす ファンデルワールス力の影響

Effects of van der Waals force on electronic structure of topological insulator superlattice

○齊藤 雄太¹、Paul Fons¹、Alexander V. Kolobov¹、富永 淳二¹ (1.産総研)

○Yuta Saito¹、Paul Fons¹、Alexander V. Kolobov¹、Junji Tominaga¹ (1. AIST)

E-mail: yuta-saito@aist.go.jp

1. 緒言

GeTe や Sb_2Te_3 は相変化材料として知られ、これまで光ディスクや不揮発性メモリ(PCRAM)用材料として研究が行われてきた。当研究グループでは、この二つの化合物を超格子状($\text{GeTe}/\text{Sb}_2\text{Te}_3$)に成膜することで、飛躍的なメモリ特性の向上を実現してきた。一方、 Sb_2Te_3 はトポロジカル絶縁体としても近年注目されている材料である。 $\text{GeTe}/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 超格子はトポロジカル絶縁体と通常の絶縁体の積層構造であるため、特異な電子構造を示すことが予測されており[1]、メモリを超えた新規デバイスとしての可能性を秘めている。 Sb_2Te_3 は層状化合物であり、Te と Te の間にファンデルワールス力による弱い結合が存在するが、これまでの電子構造計算はこの力の影響を考慮していなかった。そこで本研究ではファンデルワールス力を考慮した密度汎関数法による計算を行い、超格子構造や電子状態に及ぼす影響を調査した。

2. 計算方法

第一原理計算は WIEN2K を用いた[2]。WIEN2k は全電子計算であり、基底には LAPW 法を採用している。交換汎関数は GGA-PBE を使い、スピン軌道相互作用を考慮した。またファンデルワールス力の影響を調べるために、DFT-D3 コードを用いた[3]。

3. 結果

図1にトポロジカル絶縁体である Sb_2Te_3 のバルクバンド構造に及ぼすファンデルワールス力の影響を示した。DFT-D3 を導入することで、 Γ 点における直接遷移のバンドギャップが大きくなっていることがわかる。また、結晶構造における Te-Te ファンデルワールスギャップの原子間距離は 4%ほど短くなり、純粋な GGA だけでは過大に見積もられていたファンデルワールス結合がより正確に求められることがわかった。超格子のモデルでもこの DFT-D3 により信頼性の高い結果が得られ、応用を見据えた材料開発の一つの手段として有効であることが明らかになった。

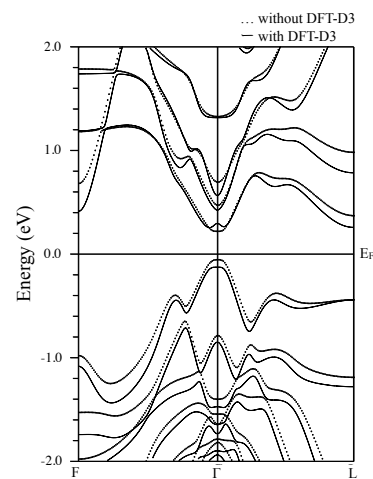


図1 Sb_2Te_3 のバンド構造に及ぼすファンデルワールス力の影響

- [1] J. Tominaga et al., *Adv. Mater. Interfaces*, **1** (2014) 1300027, [2] K. Schwarz et al., *Comp. Mater. Sci.* **28**, (2003) 259, [3] S. Grimme, *J. Comput. Chem.* **25** (2004) 1463